

唑烷环-Schiff碱互变异构中取代基效应和溶剂效应的NMR研究

杨立,陈耀祖,高坤

兰州大学应用有机化学国家重点实验室;兰州大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 合成了十个对位和间位取代的2-苯基-4,4-二基 唑烷,并用NMR研究了它们在氯仿、丙酮和二甲基亚砷中与相应的Schiff碱之间的互变异构平衡。发现在平衡常数K与取代基常数 σ^+ 之间存在着良好的线性自由能关系,说明平衡可能经历了带有正电荷的中间体。在2-位质子的化学位移 δ 与取代基常数 σ 间也存在着线性关系。 $\log K/K_0 - \sigma^+$ 和 $\delta - \sigma$ 直线的斜率都与溶剂的极性有关。

关键词 [核磁共振谱法](#) [氯仿](#) [DMSO](#) [丙酮](#) [平衡常数](#) [溶剂效应](#) [化学位移](#) [互变异构](#) [取代基效应](#) [席夫碱](#) [线性自由能关系](#) [恶唑烷](#) [P](#)

分类号 [0657](#) [0621](#)

NMR study of substituent and solvent effects on the ring-schiff base tautomerism of oxazolines

YANG LI, CHEN YAOZU, GAO KUN

Abstract Ten para- and meta-substituted 2-phenyl-4,4-dimethyloxazolines I (R = MeO, halo, NO₂, NMe₂) have been synthesized and their tautomeric equilibrium with the corresponding Schiff bases studied by NMR in chloroform, acetone and DMSO. Fairly good linear free energy relationships were found to be present between the equilibrium constant, K, and the substituent constant σ^+ , Of the substituent, indicating a positively charged intermediate may be involved in the equilibrium. The chem. shift, δ , of the 2-proton of the oxazolines is also correlated linearly with the Hammett σ of the substituent. The slopes of both the $\log K/K_0 - \sigma^+$ and the $\delta - \sigma$ lines are dependent on the solvent polarity.

Key words [NMR SPECTROMETRY](#) [CHLOROFORM](#) [DMSO](#) [ACETONE](#) [EQUILIBRIUM CONSTANT](#) [SOLVENT EFFECT](#) [CHEMICAL SHIFT](#) [TAUTOMERISM](#) [SUBSTITUENT EFFECT](#) [SCHIFF BASE](#) [LINEAR FREE ENERGY RELATIONSHIP](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [HTML全文\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“核磁共振谱法”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [杨立](#)

· [陈耀祖](#)

· [高坤](#)